

Toruń, 14.05.2026

dr hab. Jacek Zakrzewski prof. UMK
Instytut Fizyki
Uniwersytet Mikołaja Kopernika
ul. Grudziądzka 5/7
87-100 Toruń

Recenzja

pracy doktorskiej pana magistra Mohsena Dehbashi pt. „Predicting and Analyzing the Thermal and Electrical Properties of Materials Using Advanced Machine Learning Models” wykonanej w Instytucie Fizyki - C.N.D. Politechniki Śląskiej w Gliwicach

Przedstawiona do oceny, licząca 104 strony, praca doktorska pana magistra Mohsena Dehbashi dotyczy analizy właściwości termicznych i elektrycznych materiałów z wykorzystaniem zaawansowanych modeli uczenia maszynowego.

Doktorant zajął się istotnym zagadnieniem z punktu widzenia współczesnych wymagań dotyczących projektowania, produkcji i wykorzystywania urządzeń optoelektronicznych - badaniem własności cieplnych i elektrycznych materiałów służących do ich produkcji. Własnościami, które je charakteryzują są przewodnictwo cieplne (thermal conductivity - TC) i przewodnictwo elektryczne (Electrical Conductivity - EC). W urządzeniach optoelektronicznych wraz ze zmniejszaniem się rozmiarów urządzeń aktywnych, zwłaszcza w elektronice, efektywne odprowadzanie ciepła jest jednym z najważniejszych czynników decydujących o ich wydajności. Bardzo istotne jest, w przypadku cienkich warstw i struktur submikronowych, mechanizmy przenoszenia ciepła różnią się od tych obserwowanych w ich odpowiednikach objętościowych. Także dokładne określenie przewodnictwa elektrycznego cienkich warstw stanowi wyzwanie w charakterystyce materiałów.

Idea pracy jest bardzo dobra i wpisuje się we współczesne tendencje do wykorzystywania metod uczenia maszynowego do udoskonalania procesów pomiarowych, sposobów interpretacji metod eksperymentalnych i ich jakości.

Cel pracy

Główne cele pracy zostały przedstawione w kilku jej miejscach, dopiero po wprowadzeniu rozważań na temat literatury przedmiotu, co trochę utrudnia ich usystematyzowanie:

- Na stronie 6 doktorant pisze, że celem pracy jest poprawa niezawodności pomiarów przewodności termicznej w cienkich warstwach przeprowadzonych metodą termicznej mikroskopii skaningowej (Scanning Thermal Microscopy - SThM) poprzez uwzględnienie wpływu chropowatości powierzchni badanych materiałów. W pracy autor analizuje zalety i ograniczeń istniejących metod, proponuje udoskonalenie metod interpretacji danych, co ma na celu dokładniejszą charakterystyki transportu ciepła w skali submikronowej.
- Opis problemu i cel badań przedstawiony jest także w rozdziale 4 (dopiero na str. 24), gdzie wyjaśniono, że badania są podzielone na dwa główne komponenty: oznaczanie przewodnictwa cieplnego i przewodnictwa elektrycznego w cienkich warstwach.
- Podkreślono, że celem dla badań TC jest opracowanie zintegrowanej metodologii, która łączy mapowanie przestrzenne o wysokiej rozdzielczości, jednoczesną rejestracji danych termiczno-topograficznych, procedury normalizacyjne i modele uczenia maszynowego (Machine Learning - ML). Ma to na celu zwiększenie niezawodności i powtarzalności pomiarów cienkowarstwowych TC, stworzenie skalowalnej platformy

Biuro Dziekana

wpłynęło dnia 15.05.2026
RDYMa/11813/12026
nr zał.

(poprzez konwersję topografii fizycznej na numeryczne zbiory danych) z wykorzystaniem deskryptorów opartych na topografii (np. nachylenie, wysokość szczytu do doliny) oraz połączenie eksperymentalnych danych SThM z obliczeniowym modelowaniem predykcyjnym.

- Celem komponentu EC w jest stworzenie znormalizowanego i adaptowalnego systemu korekcji, który działa na danych eksperymentalnych. Autor proponuje podejście oparte na danych, w którym modele ML uczą się i korygują zniekształcenia geometryczne bezpośrednio na podstawie zmierzonych danych za pomocą metody Four-Point Probe (4PP), eliminując potrzebę stosowania sztywnych geometrii lub procedur destrukcyjnych, jednocześnie umożliwiając bardziej praktyczną i skalowalną charakterystykę EC. Równoległe opracowano również system korekcji oparty na metodzie elementów skończonych, umożliwiając porównanie otrzymanych wyników.

Obiekty badań i stosowane metody

Do badań wykorzystano komercyjne warstwy tlenku indowo-cynowego o grubości 170 nm osadzone na podłożach szklanych, wygrzewanych w sześciu różnych atmosferach. Procesy wygrzewania zostały wcześniej przeprowadzone w temperaturze 400°C w próżni, powietrzu, tlenie (O₂), azocie (N₂), dwutlenku węgla (CO₂) i mieszaninie azotu i wodoru (N₂-H₂). Podobnie, cienkie warstwy tlenku cynku uzyskano jako próbki prefabrykowane. Zostały one wcześniej wytworzone przy użyciu osadzania warstw atomowych (Atomic Layer Deposition ALD), techniki umożliwiającej precyzyjną kontrolę grubości i składu. Dostępne warstwy ZnO osadzano w dwóch temperaturach, 100°C i 200°C, z różną liczbą cykli ALD, co pozwoliło uzyskać zróżnicowanie grubości i właściwości strukturalnych warstw. W badaniu uwzględniono również materiały objętościowe o izotropowej charakterystyce termicznej. Materiały te wybrano ze względu na ich dobrze zdefiniowane właściwości termiczne i jednorodność strukturalną, które są niezbędne do dokładnej kalibracji modelu. Badane materiały objętościowe obejmowały: szkło, węgiel szklisty, monokryształ SiC, monokryształ granatu itrowo-glinowego (YAG), ZnO w postaci objętościowej oraz polimetakrylan metylu (PMMA). Materiały objętościowe posłużyły jako wzorce odniesienia, aby poprawić kalibrację modelu poprzez zapewnienie dobrze scharakteryzowanych właściwości termicznych. Informacje o rozmiarach próbek pojawiają się dopiero w rozdziale 7 na stronie 58.

Pomiar przewodnictwa cieplnego (TC) próbek cienkowarstwowych wymienionych w tabeli 5.1 został wcześniej wykonany za pomocą mikroskopu sił atomowych (AFM) (Park Systems XE-70) i dwóch różnych sond termicznych, aby zapewnić powtarzalność i zminimalizować błąd eksperymentalny. Do badań TC w pracy wykorzystano sondę SThM (KNT-SThM-3an, Kelvin NanoTechnology).

Do badań przewodności elektrycznej zastosowano metodę 4 Point Probe Technique (4PP) z metodami interpretacji opartymi na uczeniu maszynowym. Poprzez systematyczną zmianę pozycji sondy i orientacji próbki wygenerowano zbiór danych, do trenowania modelu zdolnego do kompensacji rzeczywistej złożoności eksperymentalnej.

Pomiary elektryczne przeprowadzono przy użyciu źródła prądu Keithley Model 6221 dla próbek ITO, źródła prądu Keithley Model 2231A-30-3 dla próbek metalicznych oraz nanowoltomierza Keithley Model 2182A do pomiaru napięcia wypadkowego dla obu typów próbek. Pomiary uzyskano za pomocą urządzenia 4-sondowego z 4-pinowym, 2-rzędowym, prostym złączem męskim (RS PRO) o standardowym rozstawie 2,54 mm. Aby uwzględnić efekty geometryczne i zweryfikować eksperymentalne pomiary 4PP, opracowano trójwymiarowy model MES z wykorzystaniem oprogramowania COMSOL Multiphysics.

Praca podzielona jest na dwie części, dotyczące pomiarów termicznych i elektrycznych, a z kolei każda z tych części na część dotyczącą eksperymentu i interpretacji wyników. Sądzę,

że łatwiej byłoby ją czytać, gdyby wszystkie informacje dotyczące eksperymentów zostały ujęte w jednej części, wybór należał jednak do autor.

Ważną częścią pracy jest wykorzystanie Uczenia Maszynowego (Machine Learning-ML). Jej metody: Regresja losowego lasu (Random Forest Regression) i regresja gradientowa (Gradient Boosting) wykazują niezwykłą dokładność w rejestrowaniu złożonych, nieliniowych relacji w zbiorach danych materiałowych. W dalszej części recenzji będę posługiwał się angielskimi nazwami.

Autor w pracy udowadnia, że integracja mapowania termicznego o wysokiej rozdzielczości ze szczegółową analizą topograficzną powierzchni, w połączeniu z zaawansowanymi algorytmami uczenia maszynowego, może przewyżżyć ograniczenia konwencjonalnych technik SThM.

W przypadku pomiarów EC autor dowodzi, że metoda elementów skończonych (Metoda Elementów Skończonych, ang. Finite Element Method - FEM), jak i ML mogą generować efektywne współczynniki korekcji, zdolne do łagodzenia zniekształceń geometrycznych w pomiarach 4PP. Zniekształcenia (takie jak efekty krawędziowe i odchylenia położenia sondy) znacząco wpływają na rozkład prądu i pomiar napięcia, co prowadzi do niedokładności w określaniu przewodności elektrycznej (EC). Autor zakłada, że ramy oparte na uczeniu maszynowym (ML) oferują alternatywę do FEM, która zapewnia porównywalną dokładność przy znacznie krótszym czasie obliczeń. To udowadnia, że uczenie maszynowe (ML) jest szczególnie odpowiednie do skalowalnej, wysokoprzepustowej charakterystyki przewodności elektrycznej (EC), gdzie wydajność i adaptacyjność są kluczowe.

Układ pracy oraz charakterystyka i ocena zawartości poszczególnych rozdziałów

Praca składa się z trzynastu rozdziałów, z których pierwszy stanowi wstęp do literatury dotyczącej zagadnień termicznych a ostatni spis literatury zawierający 74 pozycji. Wszystkie pozycje spisu posiadają numer doi, pozwalający łatwo na dostęp do artykułów. Rozdziały podzielone są na krótkie podrozdziały co ułatwia śledzenie wywołu autora, pozwalając lepiej zrozumieć poszczególne części. To dobre rozwiązanie.

Autor zaczyna nietypowo, nie od celu pracy a od rozdziału, który jest wstępem i jednocześnie przedstawieniem literatury przedmiotu dotyczącej pomiarów właściwości temperaturowych (cieplnych materiałów). Sam rozdział jest ciekawy i wyczerpująco opisuje zagadnienie, przedstawiając znaczenie badania tych właściwości i przedstawiając metody.

Zwrócono uwagę, że w przypadku małych rozmiarów modele teoretyczne oparte na prawach klasycznych często nie opisują dokładnie zachowania termicznego, a transport ciepła staje się silnie zależny od efektów powierzchniowych i wymiarowych. W dalszej części doktorant opisuje metody badań właściwości termicznych: Time-Domain Thermoreflectance (TDTR) Frequency-Domain Thermoreflectance (FDTR) i Scanning Thermal Microscopy (SThM).

Autor przedstawia ograniczenia TDTR i FDTR, gdyż dokładność wyodrębnionych parametrów w dużym stopniu zależy od wcześniejszej znajomości danych wejściowych eksperymentu, takich jak grubość warstwy, rozmiary plamek wiązki i pojemności cieplne.

Ograniczenie metod motywuje doktoranta do poszukiwania innowacyjnych technik umożliwiających pomiary TC o wyższej rozdzielczości.

Doktorant przedstawił podstawy działania stosowanej przez siebie metody SThM, która opiera się na wykorzystaniu sondy termicznej, która systematycznie skanuje powierzchnię próbki, jednocześnie wykrywając zależne od temperatury zmiany rezystancji w materiale sondy. Przedstawiony jest schemat układu AFM-SThM łącząc mikroskopię sił atomowych (AFM) z sondą termiczną, dzięki czemu SThM umożliwia mapowanie termiczne o ultrawysokiej rozdzielczości wraz z obrazowaniem topograficznym. Doktorant zwraca uwagę, że niespójności w pomiarach SThM (zwłaszcza te związane z chropowatością powierzchni) są szczególnie problematyczne na styku końcówki z próbką w skali

submikronowej. Podkreśla potrzebę technik nowej generacji, które pozwolą na wierniejsze uchwycenie złożonej wzajemnej zależności sił, mechanizmów wymiany ciepła i reakcji materiałów w skali submikronowej. Użycie zaawansowanych algorytmów obliczeniowych jest wykorzystane do oddzielenia właściwości materiałów od artefaktów pomiarowych, a techniki uczenia maszynowego (ML) pomagają w identyfikacji wzorców w złożonych, wielowymiarowych zbiorach danych.

Rozdział drugi to kolejny wstęp, ale też omówienie literatury dotyczące pomiarów przewodności elektrycznej. Doktorant podkreśla, wiarygodne pomiary EC w cienkich warstwach są utrudnione przede wszystkim przez efekty krawędziowe, gdzie bliskość granic próbki zakłóca rozkład prądu, co prowadzi do nierównomiernych ścieżek prądu, a tym samym komplikuje ogólne pomiary.

Opisane są dwie najczęściej stosowane metody pomiarów TC w cienkich warstwach: Technika sondy czteropunktowej (4PP) i metoda van der Pauwa (vdP), którą zmierzono wcześniej materiały wzorcowe. Metoda 4PP jest szeroko stosowana do określania rezystancji materiałów, ponieważ skutecznie eliminuje błędy spowodowane rezystancją styku. Na dokładność pomiaru wpływają takie czynniki, jak geometria próbki i położenie sondy. Geometria próbki odgrywa istotną rolę w określaniu dokładnych wartości przewodności. Rozmiar, kształt i grubość materiału wpływają na rozkład prądu, co sprawia, że konieczne jest zastosowanie współczynników korekcyjnych w celu zapewnienia wiarygodnych wyników. Doktorant podkreśla, że aby zwiększyć dokładność technik 4PP, do prac eksperymentalnych włączono symulacje numeryczne i metody obliczeniowe, co pozwoliło na udoskonalenie technik pomiarowych.

W rozdziale trzecim przedstawiono podłoże badawcze do pracy, jest to więc w jakimś stopniu kontynuacją myśli zawartej w poprzednich rozdziałach gdzie doktorant wykazał się znajomością literatury.

Dla badań przewodności elektrycznej główne wyzwanie w pomiarach EC wynika z wpływu geometrii próbki. Ta złożoność znacznie wzrasta wraz ze zmniejszaniem się cech urządzenia, co powoduje, że założenia leżące u podstaw wzorów teoretycznych ulegają załamaniu. Wymaga to przyjęcia metodologii, takich jak modelowanie MES (FEM), uwzględniające złożone geometrie i warunki brzegowe, a także opracowania podejść opartych na danych, takich jak ML, w celu automatyzacji procesów korekcji i obsługi wieloparametrowych nieidealności.

Motywacje i hipotezy badawcze przedstawione są w rozdziale 4, co zostało już opisane na początku niniejszej recenzji w części dotyczącej celu pracy. Rozdział 5 przedstawia metodologię i procedury eksperymentalne (termiczne), podrozdział pierwszy opisuje badane materiały i zastosowane metody pomiarowe, co także zostało streszczone na początku recenzji. Nasuwa mi się tu taka uwaga: w przypadku tlenku indowo-cynowego (ITO) wykorzystano próbki po sześciu różnych procesach wygrzewania. Brakuje informacji dlaczego wybrano takie sposoby obróbki termicznej próbki, jaki były ich wpływ na własności powierzchni (np. chropowatość). Autor pisze wcześniej, że własności powierzchni wpływa na pomiar i dokładność wybranej metody i nawet niewielkie zmiany topografii w skali submikronowej mogą zakłócić interakcję między sondą pomiarową a powierzchnią próbki.

Aby to zbadać ten wpływ dobrze byłoby wybrać kilka próbek materiału po tej samej obróbce powierzchni (np. wygrzewaniu), ale z różnymi parametrami powierzchni i sprawdzić jak działa opracowany przez autor model.

W tytule podrozdziału 5.3. „A Factor as ML Input for Substrate and Thickness Consideration” prawdopodobnie brakuje litery C, odnoszący się do wprowadzonego współczynnika grubości podłoża jako dodatkowego parametru wejściowy ML, aby ilościowo uwzględnić wpływ wymiarów cienkich warstw i właściwości podłoża.

W kolejnym podrozdziale autor opisuje wpływ topografii powierzchni na badanie parametrów termicznych, W metodologii charakterystyki termicznej wykorzystano strukturę (ang. Framework), w których efektywny opór cieplny każdej dyskretnej komórki siatki w

matrycy próbki (początek 5.2) był oceniany w odniesieniu do odpowiadającego mu oporu cieplnego materiału odniesienia. To różnicowe podejście zostało zastosowane w celu normalizacji odchyleń pomiarowych i wyizolowania wewnętrznych właściwości termicznych badanych próbek. Tu zabrakło opisu jak zdefiniowana jest ta komórka i z jaką strukturą (framework) mamy do czynienia, pojawi się to jednak w dalszej części rozdziału.

Autor zauważa, że chropowatość powierzchni zwiększa opór cieplny poprzez zmniejszenie rzeczywistej powierzchni styku sondy z próbką. Końcówka styka się tylko z punktami o wysokiej chropowatości (nierównościami), podczas gdy wypełnione powietrzem zagłębienia działają jak szczeliny izolacyjne. Z kolei powierzchnia o strukturze atomowej jest gładka i zapewnia niemal idealny kontakt, maksymalizując powierzchnię styku i minimalizując opór poprzez tworzenie efektywnych ścieżek przewodzenia ciepła.

Dla autora kluczowe jest opracowanie danych analitycznych dla modelu ML w celu rozróżnienia próbek objętościowych od próbek cienkowarstwowych, ponieważ cienkie warstwy wykazują zasadniczo różne właściwości transportu ciepła, które, gdyby nie zostały uwzględnione, wprowadziłyby znaczne niedokładności w mierzonym TC.

W badaniach wykorzystywane są cienkie warstwy na podłożu krzemu oraz krzem objętościowy, wyniki przewodności cieplnej (tabela 5.1) pokazują oczekiwaną znaczną różnicę (rzęd wielkości) w jej ich wartościach. Do zobrazowania możliwości metod użytych przez autora dobrze byłoby także porównać materiały gdzie warstwa ZnO osadzona byłaby na innym podłożu. Dzięki temu lepiej można byłoby pokazać jak i czy podłoże wpływa na możliwości wyznaczenia właściwości dla znajdujące się na niej warstwie. Porównanie nie jest możliwe dla ITO, nie mierzono własności dla materiału objętościowego.

W rozdziale wprowadzono współczynnik grubości podłoża (współczynnik C) jako dodatkowy parametr wejściowy ML, aby ilościowo uwzględnić wpływ wymiarów cienkich warstw i właściwości podłoża na pomiary TC podczas opracowywania modelu ML.

Na początku kolejnego podrozdziału autor opisuje framework (platformę), o którym pisał wcześniej. W badaniu wykorzystano ramy analizy mikrostrukturalnej, koncentrując się na precyzyjnie wyznaczonym obszarze o wymiarach $2 \times 2 \mu\text{m}^2$, podzielonym na siatkę pomiarową o wysokiej rozdzielczości 16×16 . Zaprojektowana architektura mikrosiatki umożliwia kompleksową charakterystykę morfologii powierzchni i jej wpływu na zjawiska transportu cieplnego w skali submikronowej. Oparte na siatce ramy analityczne umożliwiają szereg ulepszeń w metrologii termicznej. Kolejno doktorant wprowadza parametry topograficzne w skali mikro (Micro Scale Topographical Parameters) i Submicron-scale Topographical Parameters. Protokół analityczny obejmuje standardową statystyczną metrologię powierzchni, ze szczególnym naciskiem na dwa parametry topograficzne: średnią kwadratową chropowatość i skośność powierzchni. To podejście umożliwia badanie lokalnych zjawisk termofizycznych poprzez rejestrowanie parametrów w skali submikronowej, które regulują mechanizmy wymiany ciepła międzyfazowego.

Tabela 5.2 przedstawia przegląd danych zebranych i udokumentowanych podczas eksperymentów laboratoryjnych. Nie jest powiedziane, czy dane dotyczą wszystkich próbek, czy wybranych. Nie jestem powinien, jakie ma znaczenie ta tabela oprócz pokazania zakresu wielkości użytych do treningu ML, jakie wnioski można z niej wysnuć?

Doktorant wykorzystuje ramy uczenia maszynowego (ML) zaprojektowane specjalnie w celu ograniczenia błędów eksperymentalnych, nieodłącznie związanych z charakterystyką termiczną w skali submikronowej, wynikających ze złożonego oddziaływania wielu zmiennych. Model uczenia maszynowego (ML) jest trenowany na wielowymiarowym zbiorze danych, obejmującym pełen zakres eksperymentalnie mierzonych parametrów termicznych i topograficznych. Przed trenowaniem modelu metodologia uwzględnia rygorystyczny protokół selekcji cech oparty na analizie korelacji rang Spearmana. Ten etap statystycznego przetwarzania wstępnego służy kilku kluczowym celom: ilościowo ocenia predykcijną istotność każdego mierzonego parametru w odniesieniu do docelowych wartości TC oraz systematycznie identyfikuje, eliminuje zmienne o nieistotnych statystycznie korelacjach, oraz

zachowuje tylko te parametry, które wykazują silne fizyczne związki z badanymi zjawiskami transportu termicznego.

Doktorant opracował model uczenia maszynowego (ML) wykorzystujący ramy regresji, aby zapewnić precyzyjne i uogólniane prognozy TC. Integrując właściwości termiczne, topograficzne i materiałowe, przy jednoczesnym zachowaniu ciągłej natury TC, jego model ma pokonać ograniczenia metod klasyfikacji kategoryjnej. Architektura modelu została specjalnie zaprojektowana do przewidywania ciągłej zmiennej multiplikatywnej, $\chi = \kappa_s / \sigma_{si}$, gdzie κ_s reprezentuje TC próbki, a σ_{si} oznacza odchylenie standardowe wysokości powierzchni uzyskanej z pomiarów topograficznych.

W rozdziale 5.7 doktorant wprowadza nowe koncepcje związane z uczeniem maszynowym, o których pisze, że stara się wyjaśnić w sposób jak najbardziej zrozumiały, podaje też źródła do podstawowej literatury.

Wydajność modelu jest mierzona ilościowo za pomocą metryk statystycznych, takich jak R^2 , RMSE, MAE i AARD%, które łącznie wskazują, jak dobrze prognozy odpowiadają wartościom eksperymentalnym. Dla tych typowych wielkości dla analizy statystycznej można byłoby przypomnieć w tekście rozdziału ich nazwy (choć są podane na początku pracy), krótko wyjaśnić jakie wartości mogą przyjmować i co oznaczają w dopasowanych - ułatwiłoby to analizę i zrozumienie wyników.

Autor opisuje dwa modele ML, regresja losowego lasu i regresja gradientowa (Random Forest regression and Gradient Boosting regression) które okazały się skuteczne, wykazując niezwykłą dokładność w rejestrowaniu złożonych, nieliniowych relacji w obrębie zestawów danych materiałowych. Regresja lasu losowego (Random Forest Regression) i regresja gradientu wzmacniającego (Gradient Boosting Regression) to dwie zaawansowane metody uczenia maszynowego oparte na zespołach drzew decyzyjnych. Służą do przewidywania wartości ciągłych, jednak różnią się sposobem budowania modeli i podejściem do optymalizacji.

Kluczową zaletą Random Forest Regression jest jego zdolność do modelowania nieliniowych zależności między zmiennymi wejściowymi a właściwościami materiałów bez polegania na predefiniowanych formułach matematycznych.

Metoda Gradient Boosting wykorzystuje sekwencyjne podejście zespołowe, w którym każde nowe drzewo decyzyjne jest trenowane w celu skorygowania błędów resztkowych poprzednich drzew

Rozdział 6 to wyniki pomiarów i dyskusja, która zapewnia ocenę modeli ML do przewidywania przewodności cieplnej, ze szczególnym uwzględnieniem optymalizacji hiperparametrów, wyboru modelu i walidacji wydajności. Autor przedstawia ocenę modeli Gradient Boosting i Random Forest poprzez podejście oparte na rozbudowanym przeszukiwaniu siatki w połączeniu z walidacją krzyżową, w celu identyfikacji optymalnych konfiguracji hiperparametrów, które maksymalizują dokładność predykcji. Projekt eksperymentalny opiera się na szkoleniu i ocenie 279 odrębnych modeli (każdy model ma inny zestaw hiperparametrów). Niestety autor nie zawarł informacji jak zostały wybrane te modele i skąd taka liczba. Hiperparametry modeli ML, które zostały zbadane i przeanalizowane w tym badaniu są przedstawione w tabeli 6.1. Cenne jest zdefiniowanie wyjaśnienie tych wielkości pod tabelą, choć nie jest to wygodne dla czytającego.

Kolejno zostało przedstawione strojenie hiperparametrów dla metod Gradient Boosting i Random Forest Regression, wybór modelu i walidacja (6.1). Ocena porównawcza wykazała, że model Random Forest konsekwentnie przewyższał metodę Gradient Boosting pod względem dokładności predykcyjnej, co zostało potwierdzone za pomocą wielu statystycznych metryk wydajności.

Tabela 6.4. przedstawia porównanie rzeczywistych i przewidywanych wartości przewodności cieplnej κ dla próbek. Dla niektórych próbek uzyskano bardzo dobra zgodność z danymi referencyjnymi. Dobrze byłoby, gdyby w tabeli zawarte były także podstawowe informacje na temat własności powierzchni tych próbek.

Rozdział 6 kończy część dotyczącą pomiarów termicznych, kolejny rozdział jest poświęcony pomiarom i udoskonaleniom za pomocą ML przewodności elektrycznej. Nie jestem pewien, czy taki układ jest wygodny dla czytelnika, czyli rozdzielenie części doświadczalnej dla własności termicznych w rozdziale 5 i rozdziale 7 dla elektrycznej, czy nie lepiej podzielić to na części eksperymentalną i zaprezentować oba eksperymenty (termiczny i elektryczny w jednym, na początku pracy), ale to wybór doktoranta, który taką decyzję podjął. Pomiary elektryczne zostały przedstawione w rozdziale 7, aparatura użyta przez doktoranta została opisana we wstępnej części recenzji. W badaniu wykorzystano precyzyjny układ 4PP zintegrowany z metodami interpretacji opartymi na uczeniu maszynowym. Poprzez systematyczną zmianę pozycji sondy i orientacji próbki wygenerowano zbiór danych, który umożliwił wytrenowanie modelu zdolnego do kompensacji rzeczywistych złożoności eksperymentalnych.

W tabeli Tabela 7-2. Przedstawiono podsumowanie informacji na temat wymiarów próbek i pozycji sondy i podsumowanie statystyczne pomiarów eksperymentalnych, podano, że dane reprezentują 553 obserwacje na parametr. Nie jestem przekonany, czy te dane warto było umieszczać w tabeli.

W kolejnym krótkich podrozdziałach przedstawiono podstawy matematyczne i model uczenia maszynowego. Wyniki i dyskusja na temat pomiarów elektrycznych stanowią rozdział 8, na początku którego przedstawione są symulacje FEM. Celem tej symulacji było odtworzenie układu eksperymentalnego w kontrolowanych warunkach numerycznych oraz opracowanie korekty opartej na fizyce, która poprawi dokładność pomiarów przewodnictwa. Skuteczność korekty MES została ilościowo przedstawiona w Tabeli 8-1, która porównuje zmierzone, numeryczne, uzyskane za pomocą symulacji), rzeczywiste (σ_a) i skorygowane metodą MES (σ_{FEM}) wartości przewodnictwa dla próbki żelaza (Fe) dla różnych konfiguracji sondy). Wydajność modelu oceniono dla różnych ustawień hiperparametrów Random Forest Regression. Łącznie oceniono 170 różnych kombinacji hiperparametrów, aby dostroić model pod kątem uogólnionej wydajności. Pytanie jaki był klucz do wyboru tych parametrów.

Tabela 8-4 przedstawia najlepiej zidentyfikowane hiperparametry dla każdego modelu ML i odpowiadająca im dokładność przewidywań.

Kolejno przedstawione są wykresy radarowe mające pomóc wybrać najlepszych hiperparametrów. Nie do końca rozumiem, jak zbudowane zostały te wykresy – przedstawiają na trzech osiach parametry, które wielkości znacznie się różnią. Wykresy przedstawiają trójkąty zbliżone do równoramiennych, tymczasem dla np. modelu a $RMSE=16.208$, $AARD\%=3.328$, a $MAE=5.088$.

Jednak wzięcie pod uwagę samych wartości z tabeli pozwala na w prawidłową interpretacji wyników.

Ocena pokazuje, że spośród czterech modeli Random Forest(a–d), model „a” jest optymalnym wyborem ze względu na jego lepszą wydajność we wszystkich mierzonych metrykach. W zbiorze treningowym model „a” osiągnął najniższy $RMSE$ (16,208), $AARD\%$ (3,328%) i MAE (5,088), znacznie przewyższając pozostałe. Ta przewaga jest wizualnie przedstawiona na rysunku 8-4, gdzie wielokąt dla modelu „a” jest najmniejszy, co potwierdza jego najlepsze dopasowanie do danych treningowych.

Kolejno przedstawiono wydajność podejść opartych na ML i MES do szacowania EC. Przewidywane wartości EC (σ_{ML}) wyprowadzono z równania 7.4, wykorzystując wartości Θ przewidywane metodą ML, natomiast symulowane wartości EC (σ_{FEM}) obliczono za pomocą równania 7.2. Rysunek 8-7 ilustruje względną różnicę procentową ($RD\%$) między przewidywanymi a symulowanymi wartościami EC dla próbek metalowych. Brakuje informacji dla jakich konkretnie próbek zostało to pokazane, co oznaczają poszczególne okręgi i odcinki na rysunkach 8-7 i 8-9. Jednak, jak pisze doktorant wyniki te ilustrują, jak obie techniki – jedna oparta na prawach fizycznych, a druga na wzorcach danych – prowadzą do podobnie trafnych, ale charakterystycznie różnych rozwiązań problemu charakterystyki ITO.

Wyniki potwierdzają, że MES i ML mogą służyć jako uzupełniające się podejścia, przy czym MES dostarcza fundamentalnych informacji fizycznych, a ML oferuje efektywne przybliżenie empiryczne, przy czym obie metody zachowują dobrą zgodność z rzeczywistością eksperymentalną dla materiałów ITO.

Ostatni podrozdział i tabela Tabela 8-6 przedstawia porównanie teoretycznych, przewidywanych i rzeczywistych wartości EC dla dziewięciu różnych próbek, w tym czterech próbek ITO i pięciu próbek metali (Cu, W, Ni, Fe, Sn). Przewidywane wartości EC (σ_{ML} , wyprowadzone z równania 7.4) uzyskano poprzez uśrednienie wartości EC przewidywanych przez model ML przy użyciu nowego zestawu niewidocznych danych dla każdej próbki. Podobnie, symulowane wartości EC (σ_{FEM}), wyprowadzone z równania 7.2 obliczono poprzez uśrednienie wyników w różnych warunkach eksperymentalnych dla każdej próbki.

Jak pisze doktorant, wyniki podkreślają uzupełniające się mocne strony obu podejść: Random Forest Regression i Gradient Boosting. MES korzysta ze szczegółowych symulacji opartych na fizyce i zapewnia wysoką wydajność, gdy dostępne jest kompleksowe modelowanie materiałów, szczególnie w przypadku systemów ITO. Z kolei podejście ML wykazuje obiecujące możliwości generalizacji zarówno w próbkach tlenkowych, jak i metalicznych, z wyraźnym potencjałem poprawy dzięki rozszerzonym i bardziej zróżnicowanym zbiorom danych szkoleniowych. Wyniki te sugerują, że połączenie precyzji MES, opartej na fizyce, z adaptacyjnością ML, opartą na danych, może prowadzić do bardziej solidnych i niezawodnych ram charakteryzacji przewodnictwa elektrycznego w przyszłych badaniach.

Konkluzje i plany na rozwój metody są ujęte w rozdziale 9. To spójne dobrze skonstruowany rozdział, który czytelnie podsumowuje osiągnięcie doktoranta.

Ostatnie części pracy do dodatki przedstawiające mapy topograficzne i termiczne próbek do analizy właściwości termicznych, wykres par danych do badania właściwości termicznych, Dane uzupełniające dotyczące przewodności elektrycznej oraz porównanie EC eksperymentalnego, numerycznego, wewnętrznego i skorygowanego metodą MES

Niestety nie ma tam dodanych komentarzy czy, wniosków lub podsumowań.

Do najważniejszych osiągnięć pracy zaliczyć należy:

- W przypadku pomiarów termicznych
 - Opracowanie, walidacja i zademonstrowanie metodologii określania przewodności cieplnej w cienkich warstwach, która uwzględnia główne ograniczenia metody SThM, w szczególności efekty topograficzne powierzchni
 - wykorzystanie mapowania termiczno-topograficznego, strategii normalizacji i korekcji oraz uczenia maszynowego
 - potwierdzenia skuteczność łączenia strategii opartych na fizyce z uczeniem maszynowym w celu pomiaru przewodności cieplnej.
- W przypadku pomiarów elektrycznych
 - Opracowanie metody dokładnego określania przewodnictwa elektrycznego w cienkich warstwach z wykorzystaniem techniki sondy czteropunktowej.
 - wykorzystanie uczenia maszynowego i porównanie z wynikami MES, w celu skorygowania artefaktów geometrycznych zapewnienia spójności oszacowań przewodnictwa wykorzystując pomiary eksperymentalne.
 - połączenie MES i ML które umożliwia dokładną i powtarzalną charakterystykę przewodnictwa elektrycznego cienkich warstw o nieidealnych geometriach.

Wykorzystana w pracy metody i otrzymane rezultaty mają duże znaczenie praktyczne, dają możliwość stosowania nowej metody w badaniach struktur wykorzystywanych w przemyśle.

Ocena strony redakcyjnej pracy:

Praca jest napisana dobrym stylem, jest uporządkowana, wywód prowadzony jest jasno i systematycznie. Rozpoczynanie od przeglądu literatury i umieszczenie motywacji i hipotez badawczych w rozdziale czwartym nie jest posunięciem ułatwiającym poznawanie treści. Sprawnie omówiono zagadnienia dwa zagadnienia dotyczące pomiarów termicznych i elektrycznych. Metody eksperymentalne logicznie połączono z interpelacjami za pomocą uczenia maszynowego. Dobrym rozwiązaniem był podział pracy na wiele krótkich podrozdziałów ułatwiających śledzenie myśli autora i systematyzujące informacje. Wyniki, które są przedstawione w sposób graficzny są najczęściej przejrzyste i czytelne.

Konkluzja:

Mgr Mohsen Dehbashi w swojej pracy uzyskał szereg ciekawych i wartościowych wyników, które stanowią znaczne rozszerzenie aktualnej wiedzy o cieplnej mikroskopii skaningowej i Four-Point Probe. Zaproponowane metody pomiarowe i interpretacji wyników za pomocą metod uczenia maszynowego zostały szczegółowo przeanalizowane i sprawdzone eksperymentalnie. Autor zna dziedzinę w której pracuje, jego działalność dobrze wpisują się w badania, prowadzone za pomocą metod termicznych i elektrycznych w innych ośrodkach badawczych. Jego badania wpisują się także w coraz szerzej wykorzystanie metod opartych na uczeniu maszynowym do interpretacji wyników eksperymentalnych.

Analiza przedstawionych rezultatów pozwala stwierdzić, że postawione na początku cele pracy zostały zrealizowane.

Uważam, że przedstawiona mi do recenzji praca spełnia wszystkie wymagania określone w ustawie o stopniach i tytule naukowym stawiane rozprawom doktorskim i dlatego wnioskuję o dopuszczenie magister Mohsena Dehbashi do dalszych etapów przewodu doktorskiego.

Dr hab. Jacek Zakrzewski, prof. UMK

/podpis odręczny/